

РП8: Паралелни алгоритми и Грид приложения за компютърно моделиране на процеси и феномени в Микро-Електро-Механични системи (MEMS)

1. Основни дейности и резултати

Задача 8.1: *Компютърна симулация на газови течения в елементи на Микро-Електро-Механични системи (MEMS)*

Метод Монте Карло на пряка симулация (DSMC) е предложен от Graeme Bird в началото на шейсетте години на миналия век и през годините се превърна в мощен числен метод за изучаване на динамиката на разреден газ и микрофлуидиката. Метод DSMC използва ограничен набор от симулаторни частици обозначени от своите позиции и скорости , които се движат и сблъскват в изчислителната област, за да се извърши стохастично симулиране на реалната молекулярна динамика. Основната идея на метода е построен на дискретизация във времето и пространството на процесите и разделяне на движението в два последователни етапа на свободно молекулно движение и двоични междумолекулни сблъсъци в клетките на мрежата по време на една стъпка на алгоритъма. Сърцето на метода е стохастичната схема на бинарни удари между частиците. В резултат на последователни теоретични изследвания , популярност са придобили няколко схеми на разиграване на бинарни удари всичките конструирани на базата на принципа на максимална честота на ударите: "No Time Counter (NTC) ", " Null - Collision ", " Majorant Collision Frequency". Най-често използваната схема е NTC схема на Бърд . Под една или друга форма тази схема присъства в най-съвременните приложения на DSMC метода , които използват структурирани и неструктурирани мрежи. Две основни проблема са разкрити в допълнение към присъщите проблеми на дискретизация, а именно , наличието на статистическа шум в численото решение и зависимостта на резултатите от броя на частиците в клетките на мрежата. Доскоро не беше обърнато голямо внимание към втория проблем. По принцип, всички схеми използващи принципа на максимален брой двойки частици в клетка, изискват голям брой частици ($N > 10-20$) в клетка , за да се получат добри резултати. Причината е, че всички тези алгоритми чрез използване на метода на селекцията за изчисляване на действителния брой на ударите позволяват повтарящи се удари между една и съща двойка частици, което води до нарушаване на процеса в клетки с малък брой частици. Алтернативен начин на изграждане на алгоритми на бинарни взаимодействия е предложен от Яницки на базата на стохастичен модел Кас на процеса на бинарни взаимодействия в хомогенен разреден газ. При този подход се предлага ударите да се разиграват с определена вероятност в съответствие със стохастичния модел на Кас. Предложената схема опити на Бернули не е получила широко разпространение, което се дължи на факта , че нейната ефективност зависи от квадрата на броя на частиците в клетка . Въпреки това, тази схема демонстрира по-голяма точност за малък брой частици на клетка в следствие на избягване на реализация на повторни удари. В тази статия ние следваме подхода на Яницки и показваме как да се получат ефективни схеми от стохастичния модел на Кас без повторни удари. Резултатите са докладвани на 28 Международен симпозиум по динамика на разредения газ, 9-13 юли 2012, Сарагоса, и публикувани в [S_12].

Симулацията по метод DSMC при малки числа на Кнудсен при микро / нано размери на областите, в които се реализира газовото течение, остава голямо предизвикателство за изследователите вследствие на големите изчислителни изисквания. В тази статия, прилагането на опростената схема на опити на Бернули (SBT) върху двойна мрежа се прилага за симулация на течения в нано област при малки числа на Кнудсен и малки скорости на течението. Основното предимство на алгоритъма SBT е да реализира точни изчисления с много по-малък брой частици на клетката, т.е. $\langle N \rangle = 2$, което е полезно за симулации при малки числа на Кнудсен, когато изискването на използване на мрежа с висока резолюция поставя сериозни ограничения пред метода на симулация. Сравнявайки резултатите от SBT / двойна мрежа с (NTC) схема и схема (MFS), е видно, че SBT / двойна мрежа може успешно да се предскаже топлинното поле и хидродинамиката в областта, както и повърхностните параметри като

скорост на приплъзване, скок на температурата и потокът топлина през границите на областта. Затова представяме схемата SBT / двойна мрежа като подходяща алтернатива на стандартните схеми на удари в DSMC метода при разглеждане на типични микро / нано течения. Нелинейната схема на коригиран транспорт (FCT) се използва като филтър за извличане на гладко решение от данните получени по метод DSMC за течения с ниска скорост и малко число на Кнудсен. Резултатите от това изследване са публикувани в статия [JRNS_13].

Бързото развитие на микро-електро-механични устройства води до създаването на потенциално нови приложения на микрофлуидиката. Анализът на възможните режими на течение на флуида е важна част при всяко изследване на микрофлуидно течение. Преходът между стационарен и нестационарен режими при газови течения се извършва за малки числа на Кнудсен $Kn < 0.1$ ($Kn = l_0/L$, където l_0 е средният свободен пробег на молекулите на газа и L е характерен размер). Континуалният подход, основан на системата от уравнения на Навие-Стокс-Фурие е приложим за такова изследване. От друга страна, микрофлуидните системи изискват задачата да се пресмята за много ниски числа на Мах ($M=0.1$), което е в близост до несвиваем режим. Това прави методите базирани на налягането много подходящи за изследването на тези течения. Системата от уравнения на Навие-Стокс-Фурие се пресмятат числено използвайки метод базиран на налягането - алгоритъм SIMPLE-TS. Изследването на крайното състояние на обтичането на квадрат в микроканал, като функция на числата на Кнудсен и Мах изисква пресмятането на серия от задачи. Всяка задача изисква изчислително време от 6 до 100 часа изпълнена на 50 до 100 процесорни ядра. Типичното за тези задачи е, че изчисленията са много интензивни, а се използва малко памет (8000x100 клетки, което е 35MB RAM на серийна програма). Тези изисквания се вписват идеално в характеристиките на днешните векторни процесори - graphics processing unit (GPU) и ни мотивират да разработим GPU версия на алгоритъма SIMPLE-TS. Първоначално в алгоритъмът SIMPLE-TS за GPU бе реализирана схема на апроксимация на конвективните членове и плътността в междинните точки от първи ред против потока. Производителността на изчисленията с плаваща запетая с двойна точност при обтичането на квадрат в микроканал със свръхзвукова скорост $M=2.43$ на GPU AMD Radeon HD 7950 е 90 GF/s, което е 1/8-ма от максимална производителност на устройството (717 GF/s) и е 46 пъти по-бързо от серийния CPU код изпълнен на процесор Intel Xeon X5560. Резултатите са докладвани на 9-та международна конференция "Large-Scale Scientific Computations" проведена в гр. Созопол, България, от 3 до 7 юни, 2013, [1]. Публикацията [SAS_13a] е приета. Допълнително в алгоритъмът SIMPLE-TS за GPU са реализирани TVD числени схеми от втори ред за апроксимация на конвективните членове и плътността в междинните точки. Публикацията [SAS_13p] е в процес на подготовка.

Задача 8.2: Термоеластични трептения с големи амплитуди на конструктивни елементи с приложение в MEMS и методи за откриване на повреди в тях .

Тази задача включва моделиране на нелинейното динамично поведение на здрави и дефектни конструктивни елементи намиращи приложение в MEMS и създаване на методи за откриване на дефекти. В рамките на тази задача беше създаден модел за изследване на нелинейното динамично поведение на слоисти греди с отслояване.

Създаденият модел представлява разширение на съществуващите досега модели за динамика на греди с отслоявания. Моделът отчита контактното взаимодействие (прилепване/отлепване) на подслоевите, като отчита освен нормалните усилия между слоевете също и появяващите се срязващи такива. Освен това, поради наличието на триене между подслоевите по време на контакт между тях, се отчита допълнително демпфиране на трептенията.

Беше създаден числен модел на базата на метода на крайните разлики по пространствените координати и метода на Гийр за решаване на ОДУ по времето и бяха получени числени резултати за динамичното реагиране на греди с и без отслоявания.

За верифициране на резултатите бяха проведени и експериментални изследвания. За целта бяха произведени слоисти композитни греди от епоксидни слоеве и от Кевлар. За моделиране на отслояването в два съседни слоя бяха вмъкнати (чрез изрязване на малки части от съответните

слоеве и вмъкване на включения) тънки слоеве от различни материали : Тефлон, стомана, титан и алуминий.

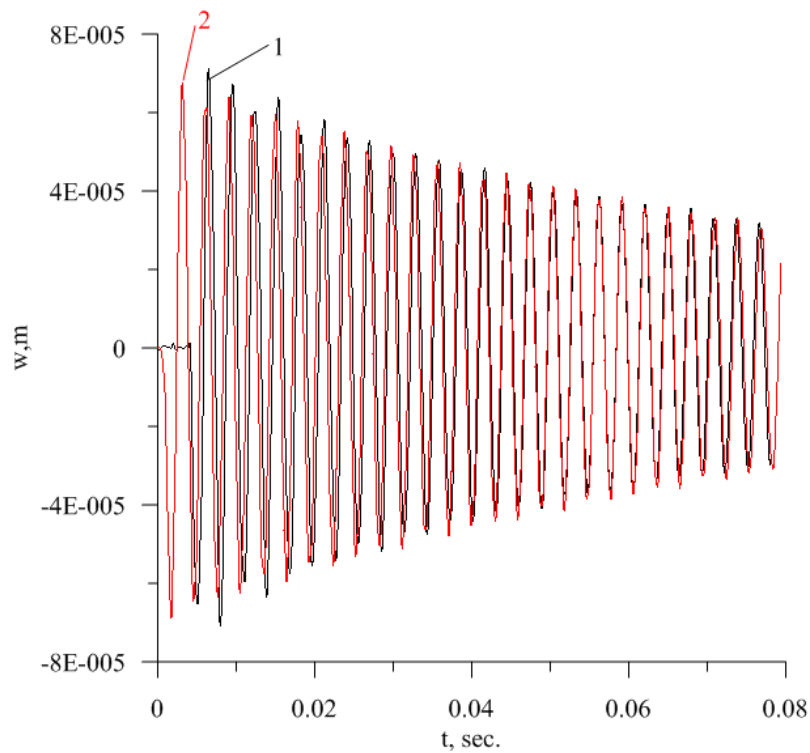


Figure 1. Time history diagram of the beam centre in the case of the Teflon inclusion. 1 (Black colour) – experimental results, 2 (red colour) – numerical results. $t_0=0.00141$ s.

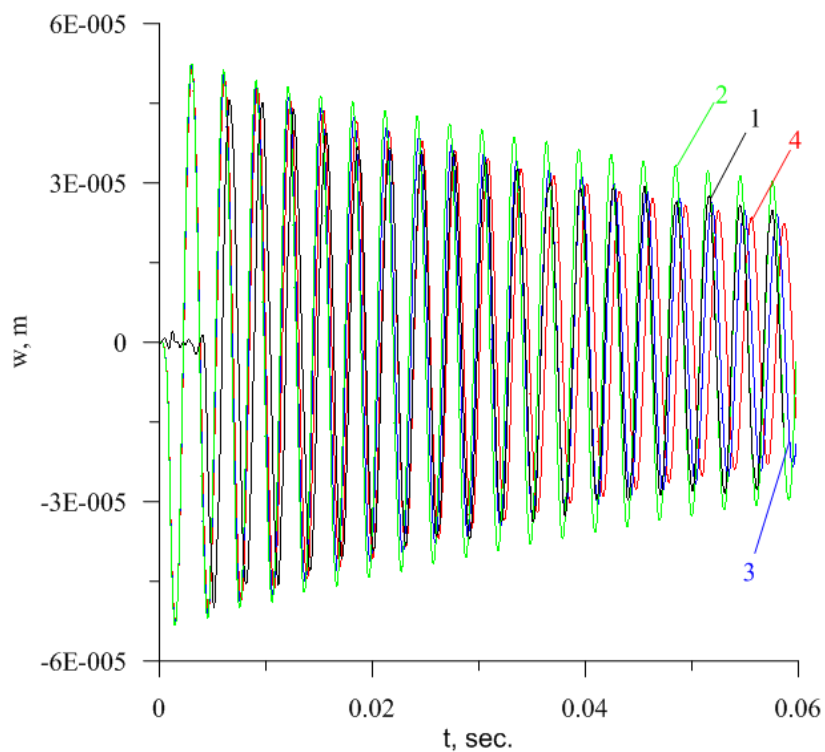


Figure 2. Time history diagram of the beam centre in the case of titanium inclusion. 1 – black color – experimental results; 2 - Green colour – $\bar{c}_{1_{\text{titanium}}} = 0$, 3- Blue colour - $\bar{c}_{1_{\text{titanium}}} = 0.0015365$, 4- red colour – $\bar{c}_{1_{\text{titanium}}} = 0.003073$

Използването на различни включения целеше да се провери влиянието на триенето между включенията върху реагирането на гредата. За експеримента беше използван модален чук, с който запънатите образци бяха възбуджани да трептят, като контактната сила беше записвана. Реагирането на конструкциите беше измервано посредством лазерен сензор.

Част от резултатите са показани на фигури 1 и 2.

От показаните фигури се вижда ясно доброто съвпадение между числени и експериментални резултати както и влиянието на затихването вследствие отслояването върху реагирането на гредите. Изследвани са влиянието на мястото и дължината на отслояването върху реагирането на конструкцията

Тези резултати са публикувани в статии в международните списания *Mechanics Research Communications* и *European Physical Journal – Special Topics*.

Моделът е разширен като са отчетени геометрически нелинейните членове, появяващи се вследствие големи премествания както и температурни натоварвания. Първите резултати са докладвани на EUROMECH colloquim 541 "New Advances in the Nonlinear Dynamics and Control of Composites for Smart Engineering Design" – Senigallia, Italy, 03-06.06.2013. Работата в това направление продължава.

Трептения с големи амплитуди при отчитане влиянието на температурни промени са изследвани в работата представена на *9th International Conference on Multibody Systems, Nonlinear Dynamics, and Control*, August 4-7, 2013, Portland, Oregon, USA. Предположено е, че температурата на гредата се повишава мигновено и че е равномерно разпределена по дължината и сечението на гредата. Математическият модел е представен чрез частни диференциални уравнения при гранични условия за просто подпряна греда. След това задачата е редуцирана по метода на Гальоркин чрез използване на формите на свободни трептения. Влиянието на температурата върху локализацията на резонанса и върху нелинейните трептения (амплитудно-честотни криви) е изследвана аналитично по метода „multiple scale“. Резултати показващи влиянието на температурата и големите премествания върху честотно амплитудните характеристики и бифуркационните диаграми са показани на – Фигури 3 и 4.

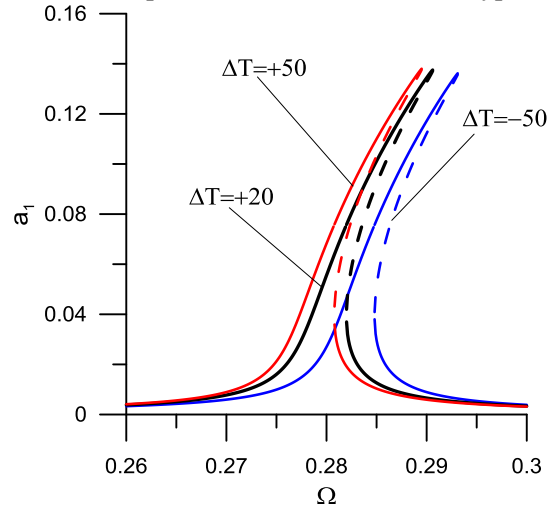


Figure 3. Resonance curve calculated for selected values of temperature $\Delta T = -50$, $\Delta T = 20$, $\Delta T = +50$ and fixed mechanical loading $p_1 = 4 \times 10^{-5}$.

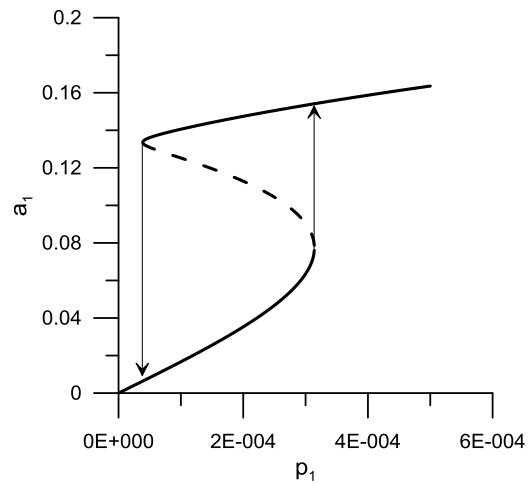


Figure 4. Bifurcation curve versus varied amplitude of mechanical loading and fixed temperature $\Delta T = 20$, excitation frequency (a) $\omega=0.27$, (b) $\omega=0.29$.

Понастоящем се работи върху модел, който използва 3 моди за редуциране.

2. Публикации по темата на проекта, където е цитиран проект SuperCA++- 2009 No DCVP 02/1

а) излезли от печат:

[S_12] S. Stefanov, DSMC collision algorithms based on Kac Stochastic Model, AIP Conf. Proc. 1501, 609-615 (2012); doi: 10.1063/1.4769598, ISBN: 978-0-7354-1115-9,

[JRNS_13] A. Amiri-Jaghargh, E. Roohi, H. Niazmand, S. Stefanov, DSMC simulation of low Knudsen micro/nanoflows using small number of particles per cells, Journal of Heat Transfer **135**(10), 101008-1-101008-8 (2013). doi:10.1115/1.4024505

[MWAS-12] E. Manoach, J. Warminski, S. Samborski, A. Mitura, Dynamics of a composite Timoshenko beam with delamination. Mechanics Research Communications. 46 (2012), 47-53,

[MSAW-12] E. Manoach, S. Samborski, A. Mitura, J. Warminski. Vibration based damage detection in composite beams under temperature variations using Poincaré maps. Int. J. Mechanical Sciences, 62 (2012), 120-132.

[WWM-13] Warminska, A., Warminski, J., Manoach, E. Temperature influence on nonlinear responses of Timoshenko beam. 9th International Conference on Multibody Systems, Nonlinear Dynamics, and Control, August 4-7, 2013, Portland, Oregon, USA. Paper: DETC2013-12624.

[MWAS-13] E. Manoach, J. Warminski, A. Mitura, S. Samborski, Dynamics of a laminated composite beam with delamination and inclusions. European Physical Journal – Special Topics, **222**, 1649-1664 (2013)

б) приети за печат

[SAS_13a] K. Shterev, E. Atanassov and S. Stefanov, GPU calculations of unsteady viscous compressible and heat conductive gas flow at supersonic speed, 9th International Conference on "Large-Scale Scientific Computations" June 3-7, 2013, Sozopol, Bulgaria.

в) изпратени за публикуване

г) в процес на подготовка

[SAS_13p] K. Shterev, E. Atanassov and S. Stefanov, GPU calculations of unsteady viscous compressible and heat conductive gas flows.

[WWM-13 p] J. Warminski, A. Warminska, E. Manoach. Nonlinear multimodal interactions of a reduced Timoshenko beam subjected to thermal and mechanical loading

3. Презентации и доклади

[1] K. Shterev, GPU calculations of unsteady viscous compressible and heat conductive gas flow at supersonic speed, 9th International Conference on "Large-Scale Scientific Computations" June 3-7, 2013, Sozopol, Bulgaria.

[2] S. Stefanov, 28-th International symposium on rarefied gas dynamics 2012, 9–13 July 2012, Zaragoza, Spain.

[3] E. Manoach, A. Warminska, J. Warminski, Large amplitude vibrations of timoshenko beams with delamination in thermal environment. Доклад изнесен на конференцията EUROMECH colloquium 541 "New Advances in the Nonlinear Dynamics and Control of Composites for Smart Engineering Design" – Senigallia, Italy, 03-06.06.2013

4. Други

[1] Диагностика и преинсталиране на операционната система на компютърния клъстер на ИМех